

DESENVOLVIMENTO DE LIGANTES CONTENDO BRAÇOS PIRIDÍNICOS E OXAZOLÍNICOS PARA SÍNTESE DE COMPOSTOS DE COORDENAÇÃO CONTENDO METAIS DA SÉRIE 3d

Samuel Rodrigues Mendes¹, Andrei Felipe Vailati², Fernando Roberto Xavier³

¹ Orientador, Departamento de Química. CCT – samuel.mendes@udesc.br

² Acadêmico(a) do Curso de Licenciatura em Química CCT - bolsista PROBIC/UDESC.

³ Professor Participante do Departamento de Química CCT.

Palavras-chave: Rota sintética. Caracterização. Síntese Complexos.

Nucleases que catalisam a replicação do DNA e do RNA apresentam em seus sítios ativos íons metálicos, com isso atualmente, há um grande interesse da comunidade científica em compreender o papel biológico destes átomos nestas macromoléculas e, por consequência, o desenvolvimento de sistemas químicos mais reativos e eficientes na hidrólise de ligações fosfodiéster.¹ E esta é uma das áreas de estudo da química bioinorgânica, compreender o papel dos metais (em particular dos metais de transição) em sistemas biológicos, na busca para entender melhor a função destes nos sistemas vivos. E um dos principais focos desta área é estudo do papel destes íons metálicos em biomoléculas tais como enzimas. Sendo assim, uma importante área de pesquisa em bioinorgânica tem sido o desenvolvimento de complexos metálicos que mimetizam a função de metaloenzimas, pois, devido à complexidade destas macromoléculas, complexos-modelo constituem uma importante ferramenta na compreensão de suas vias mecanísticas.² Também verifica-se que ao longo das décadas passadas, muitos compostos sintéticos mono, di- e multinucleares foram desenvolvidos como modelos estruturais e/ou funcionais para nucleases e proteases. Desde então, iniciou-se um processo de desenvolvimento de novos ligantes simétricos e não-simétricos que mimetizem os centros ativos destas macromoléculas de maneira cada vez mais eficiente.³ No sentido de potencializar os efeitos catalíticos gerados por estas classes de compostos supracitadas, a funcionalização de ligantes com agentes intercalantes de ácidos nucleicos tem atraindo a atenção de muitos químicos sintéticos e bioquímicos.⁴ Deste modo este trabalho tem como objetivo a síntese de um ligante contendo braços piridínicos e oxazolínicos para ser utilizado na síntese de complexos mononucleares com metais da série de transição 3d. Para isso está sendo desenvolvida uma rota sintética já que o ligante desejado ainda não é descrito na literatura, devido a este fato foi feita uma revisão bibliográfica para buscar reações descritas na literatura que poderiam ser utilizadas na síntese do mesmo. Em seguida foram feitos testes para encontrar as melhores condições de síntese. E as condições estabelecidas para as três etapas da síntese estão descritas a seguir: na primeira etapa a síntese da oxazolina foi feita de acordo com o método descrito por Pridgen (1983)⁵, na segunda etapa utilizou-se o método descrito por Xavier(2010) e a terceira etapa foi feita de acordo com a síntese descrita por Zhang(2006)⁷. A rota sintética da molécula proposta está representada na figura 1 e os compostos obtidos foram caracterizados via cromatografia gasosa acoplado ao

espectômetro de massas (CGMS) e ressonância magnética nuclear de hidrogênio (RMN ^1H) e carbono (RMN ^{13}C). As próximas etapas do trabalho serão a síntese do complexo com os metais da série 3d e sua caracterização e com o andamento do trabalho pretende se adicionar um grupo intercalante ao ligante e este também será caracterizado para verificar se há uma melhor interação deste com a dupla fita do DNA em relação ao ligante sintetizado inicialmente.

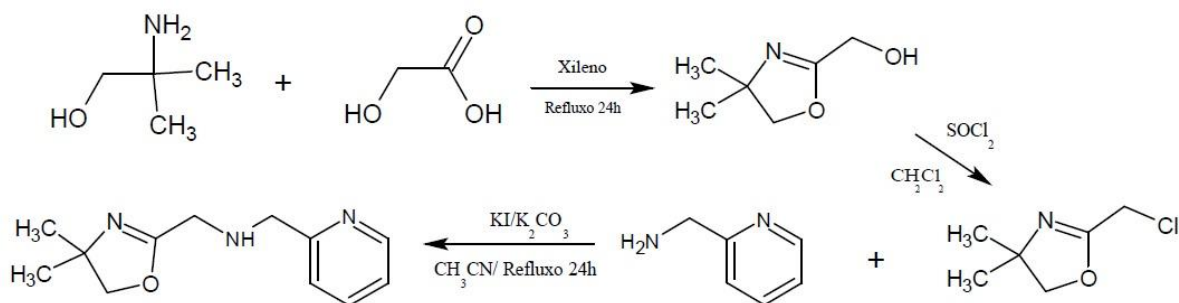


Fig. 1 Rota Sintética do Ligante

Referências bibliográficas:

- ¹WILLIAMS, N. H.; TAKASAKI, B.; WALL, M.; CHIN, J. *Acc. Chem. Res.*, 1999, 32, 484.
- ²Mitic, N. et. al. *Chemical Reviews*, **2006**, 106(8), 3338.
- ³DESBOUIS, D.; TROITSKY, I. P.; BELOUSOFF, M. J.; SPICCIA, L.; GRAHAM, B. *Coord. Chem. Rev.* 2012, 256, 897.
- ⁴Liu, H.; Sadler, P. J. *Acc. Chem. Res.* 2011, v. 44(5), p. 349.
- ⁵PRIDGEN, L. N., MILLER, G., Synthesis of 2-(α -hydroxyalkyl)-1,3-heterocyclic alcohols and aryl carbamates. *Journal of Heterocyclic Chemistry*, v. 20, p.1223-1230,1983.
- ⁷Zhang, X.J.; Li, H.Y.; You, L.F.; Tang, Y.; Hsung, R.P. Copper salt-catalyzed azide-[3 + 2] cycloadditions of ynamides and bis-ynamides. *Adv. Synth. Catal.* 2006, 348, 2437–2442.